29．ミクロカノニカル法による相転移研究

早大理工　森川善富
大竹淑恵

我々は、’改良されたミクロカノニカル法’に基づき、相転移点近傍の系の振舞いを研究した。この手法によれば、温度をほぼ連続的に変化させることができるが、その代償として系を熱平衡に保つことができない。しかし、系から熱を引くスピードを表すパラメーターC0に関する外挿により、熱平衡状態の系に関しての議論が可能となる。

モンテカルロ法とミクロカノニカル法の大きな相違は、温度βがインプット・パラメーターであるかアウトプット・パラメーターであるかの違いである。このためモンテカルロ法では物理量は温度の1価関数になるが、ミクロカノニカル法では多価関数になり得る。例えば内部エネルギーと温度の関係は、2次相転移点近傍ではどちらの手法でも1価関数になるが、1次相転移点近傍ではミクロカノニカル法では内部エネルギーの多価性を示すS字カーブが現れる。[1),2),3)] (Fig. 1)。またモンテカルロ法では、温度βがインプット・パラメーターすなわちコントロールできるパラメーターであるのに対し、ミクロカノニカル法では、温度βではなくミクロカノニカル系の全エネルギーEがインプット・パラメーターすなわちコントロールできるパラメーターとなる。よってモンテカルロ法に基づき相転移点近傍を調べるには$\delta\beta\to 0$の極限(Fig. 1参照)として各βでの熱平衡値を求めるが、ミクロカノニカル法では、それに対応して$\delta E\to 0$として各Eにおける熱平衡値を求める。改良されたミクロカノニカル法では、さらに$\delta E\fallingdotseq 0$の場合を考え、系を熱平衡に保たずに常にエネルギーを変化させて物理量を調べる。

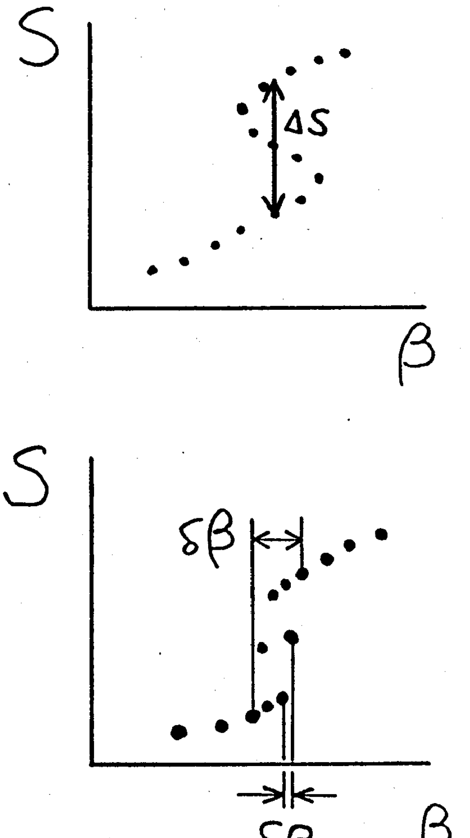


図1、1次相転移点近傍での内部エネルギー－温度グラフ
(a) ミクロカノニカル法
(b) モンテカルロ法

具体的に改良されたミクロカノニカル法では、$\delta E\fallingdotseq 0$のエネルギー変化を実現するために、従来のミクロカノニカル法で用いるHamilton's Eqs. に摩擦項を付け加える。この摩擦項の係数がC0であり、系から熱を引くスピードを表す。

$$\frac{dp_i}{d\tau} = -\frac{\partial H_m}{\partial \Phi_i} - C' p_i ,$$

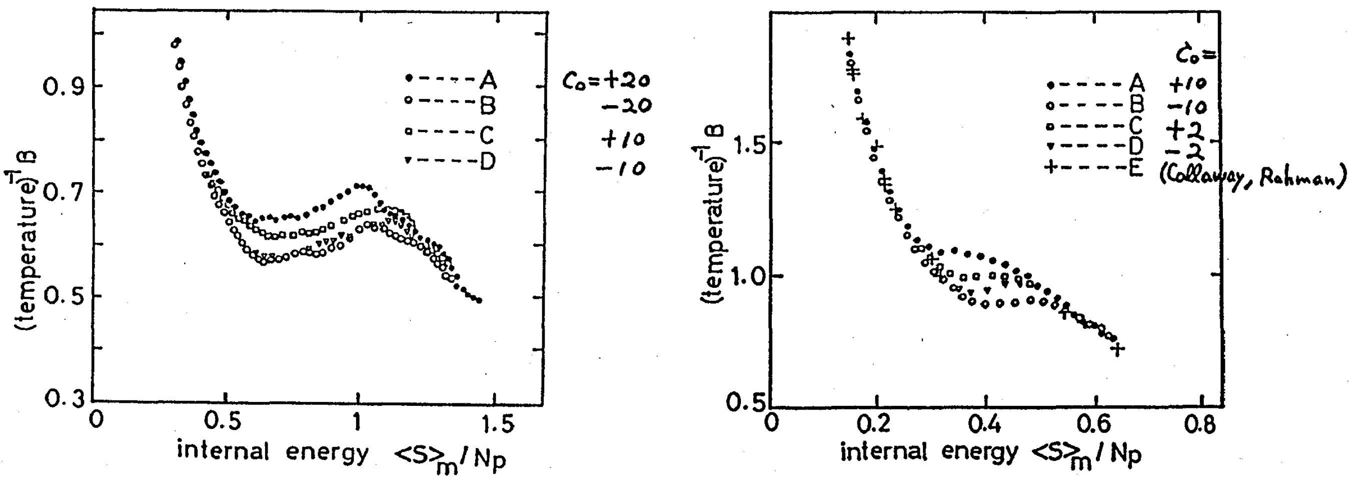
$$\frac{d\Phi_i}{d\tau} = \frac{\partial H_m}{\partial p_i} ,$$

ここで、 $C' = C_0 / \sum_i p_i^2$, $\frac{\Delta H_m}{\Delta \tau} = -C_0$ である。この手法によれば、エネルギー変化がほぼ連続なので、内部エネルギー―温度(など)のグラフ上でほぼ連続的にデータが取れるのである。詳細に関してはRef.4),5),6)を御参照下さい。

モデルとしては、U(1)ゲージモデル[7]を取り上げ、4^4格子で数値計算を行った。

$$\beta S = \sum_p [\ \beta_1\ [1 - \frac{1}{2}(\ U_p + U_p^{\dagger}) + \beta_2 [1 - \frac{1}{2}(\ U_p^2 + U_p^{\dagger 2}\ )]]$$

ここで、 $U_p = \prod_{l \in p} e^{i\theta_l}$ は、プラケットpに対するプラケット変数であり、θ_lは、リンク1に対する座標である。1次相転移点($\beta 1 = \beta 2 \fallingdotseq 0.6$)近傍ではFig.2a、2次相転移点($\beta 1 \fallingdotseq 1.0, \beta 2 = 0$)近傍ではFig.2bの結果が得られた。



(a)　　　　(b)

図2、内部エネルギー―温度グラフ
(a) 1次相転移点($\beta 1 = \beta 2 \fallingdotseq 0.6$)近傍
(b) 2次相転移点($\beta 1 \fallingdotseq 1.0, \beta 2 = 0$)近傍

Fig.2aは明らかにS字カーブであるが、Fig.2bではS字カーブがみられない。これは、1次相転移では潜熱の解放があるため内部エネルギーに多価性が現れるのに対し、2次相転

移では潜熱の解放がないため多価性が現れないからである。このように改良されたミクロカノニカル法では、相転移の次数の推定ができる。より正確にはS－βグラフを３次関数で最小二乗フィットした時の”潜熱”ΔSにより、扱っている相転移が、どれだけ強い１次の性質を持つかが、推定できるのである。これはモンテカルロ法におけるヒステリシスの大きさを調べることに対応する。

但し、系を熱平衡に保たずに数値計算を行っているので、ΔSは厳密には潜熱とは異なる。厳密に潜熱を求めるためには、系を熱平衡に保たなければならないのでC0→0の熱平衡極限をとらなければならない。

次に１次相転移の場合の典型的なΔS－C0グラフを示す(Fig.3)。（これは、preliminaryな結果である。詳細はRef.8)を御参照下さい。）データが４点しかないのではっきりしたことはいえないが、C0＝１０でΔSが最大になり、C0→大、C0→小でΔSの値が下がっている。C0→大でΔSが小さくなるのは以下のようにして理解できる。系から熱を引く速さが速くなっていくと、相転移点近傍で潜熱が解放されても系に吸収されずに摩擦熱として出ていくためΔSが小さくなるのである。一方C0→小でΔSが小さくなるのは以下のように理解される。数値計算が熱平衡に近づくと系の過冷却される度合が減っていきΔSが小さくなる。いくつかのモデルに対して予想されるΔS－C0グラフをFig.4に示す。いずれもΔSの値は、あるC0の値でピークを持つ山型のグラフになるはずである。以前述べたように、有限の大きさC0で”潜熱”ΔSを調べることにより、扱っている系がどれだけ強く１次の性質を持つかを推定できる。またΔSをC0→０へ外挿した値は真の潜熱となるので、上記の性質を厳密に決定できる。特にΔS（C0→０）＝０の場合は扱っている系は２次相転移の性質を持つと決定できる。数値計算の速度に関しては、今の所モンテカルロ法に比べてメリットはない。しかし同じゴールを目指すのに別の手法で扱うことに意味があろう。（（障害物がどこにあるかは解らないのだから・・・））

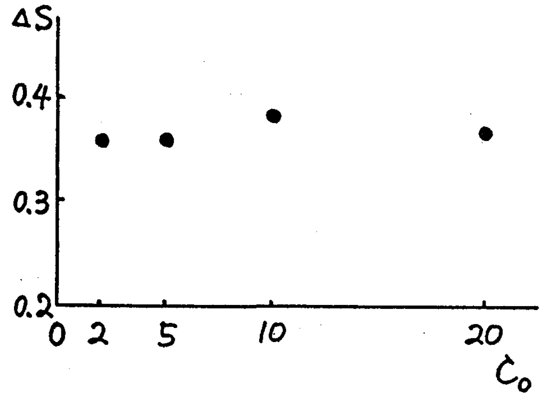


図３、１次相転移の場合の典型的なΔS－C0グラフ

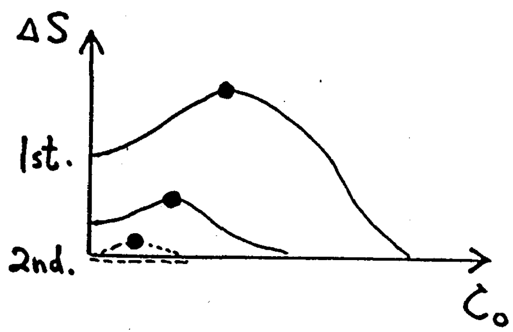


図４、予想されるΔS－C0グラフ

相転移点も同様にC0→０と外挿することにより求まるが、詳細は省略する（Ref.6),9))。

以上のように、我々は改良されたミクロカノニカル法に基づき$\delta E \fallingdotseq 0$、$C0 \to 0$の手法で相転移点近傍の系の振舞いを研究した。しかしながら、改良されたミクロカノニカル法はまだまだ考慮せねばならぬ点が多々残っている。

一番大きな問題点は、現時点では離散系を扱えないことである。運動方程式を追いかけるので、変数が連続でなければならないのである。モデルによっては連続系へ変数変換できるが、一般的指針が今のところない。この問題点は、従来のミクロカノニカル法、ランジュバン方程式を追いかける確率過程法、及びハイブリッド法とも共通の問題である。ミクロカノニカル法に関しては、最近ガウシアンアンサンブルを用いる手法が提唱され、運動方程式を解くのではなく、モンテカルロ法のようにアンサンブルを作り出すことで平均を取ることが試みられている。[10]

次に問題となるのは、系のエルゴード性であろう。これは従来のミクロカノニカル法とも共通の問題である。この問題に関しては、少数自由度系では研究が盛んに行われているが、多数自由度系ではまだほとんど行われていないのが現状である。我々が扱ったモデルにおいては簡単なチェックは行ったが本当にエルゴード性が成立しているか否かは、成立していると期待するしかない。

改良されたミクロカノニカル法では、今のところ初期条件に依存する結果が得られている。しかしながら、$C0 \to 0$の熱平衡極限でその初期条件依存性は消えるはずであり、現在解析中である。[8]

また、完全に２次のモデルではＳ字カーブが消えるはずであり、この方面の研究も現在進行中である。[9]

さらに、正確に相転移の次数、場所を決定するには、無限系を扱わねばならない。しかしながら現在はＣＰＵの都合上、4^4格子しか扱えなかった。この有限サイズの効果も将来的には定量的に調べられねばならないだろう。

Reference

1) D.Callaway and A.Rahman, Phys.Rev.Lett.49(1982),613
2) J.Polony and H.W.Wyld, Phys.Rev.Lett.51(1983),2257
3) U.M.Heller and N. Seiberg, Phys.Rev.D27(1983),2980
4) 森川善富, 物性研究46-2(1986-5)
5) Y.Morikawa and A.Iwazaki, Phys.Lett.165B(1985),361
6) Y.Morikawa, WU-HEP 1987-9
7) G.Bahnot, Nucl.Phys.B205[FS5](1982),168
8) Y.Morikawa and Y.Otake, in preparation
9) Y.Morikawa and Y.Otake, in preparation
10) M.S.S.Challa and J.H.Hetherington, Phys.Rev.Lett.60(1988),77